

**СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ДИСЕЛЕНИДА ЦИРКОНИЯ,
ИНТЕРКАЛИРОВАННОГО МЕДЬЮ**

*Постников М.С.⁽¹⁾, Титов А.Н.⁽²⁾, Меренцов А.И.⁽¹⁾, Шкварин А.С.⁽²⁾,
Шкварина Е.Г.⁽²⁾, Упоров С.А.⁽³⁾*

⁽¹⁾ Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

⁽²⁾ Институт физики металлов УрО РАН
620108, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, д. 18

⁽³⁾ Институт металлургии УрО РАН
620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д. 101

Слоистые дихалькогениды переходных металлов (СДПМ) с точки зрения структуры представляют из себя последовательность фрагментов, в которых слой атомов переходного металла с обеих сторон окружен слоями атома халькогена. Атомы внутри слоя связаны между собой гораздо сильнее, чем эти слои между собой. Поэтому существует возможность интеркаляции СДПМ - обратимого внедрения различных объектов в межслоевое пространство. Интеркаляция СДПМ вызывает интерес, поскольку дает возможность вести тонкую регулировку структуры и свойств получаемых материалов.

Был проведен синтез системы Cu_xZrSe_2 ($0,05 \leq x \leq 0,6$; с интервалом 0,05) из ZrSe_2 и металлической меди. Порошки дихалькогенида и меди были смешаны и спрессованы в этом соотношении и оставлены при комнатной температуре на несколько дней.

Кристаллическая структура исследовалась методом полнопрофильного анализа порошковых дифрактограмм при комнатной температуре. Для составов Cu_xZrSe_2 , где $x=0,1, 0,2, 0,3$, удалось вырастить монокристаллы и выполнить исследование электронной структуры спектральными методами. Выполнены исследования электропроводности в интервале температур 10-300K, магнитной восприимчивости (3-300K), электронная структура исследована на монокристаллах методами фотоэмиссионной спектроскопии (XPS), спектроскопии поглощения (XAS), резонансной фотоэмиссионной спектроскопии (ResPES).

Структурный анализ показал, что медь занимает тетраэдрически координированные позиции в межслоевом пространстве. Анализ ResPES показал формирование ковалентной связи Cu-Zr, вероятно, вследствие гибридизации $\text{Cu}3d/\text{Zr}4d$ состояний. Установлено, что медь отдает электрон решетке, что приводит к уменьшению энергии связи на одинаковую величину для всех электронных оболочек. Проводимость показывает переход от активационной зависимости, при малых содержаниях меди, к металлической. В составе соответствующем переходу, наблюдается увеличение плотности состояний на уровне Ферми, что интерпретировано как выход уровня Ферми в зону проводимости.